

УДК 539.21

## РАСЧЕТ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ В НАНОЗЕРНЕ, ОБУСЛОВЛЕННОГО НАНОДВОЙНИКОВАНИЕМ

Т.В. ДРОБЫШЕВСКАЯ, канд. физ.-мат. наук О.М. ОСТРИКОВ  
(Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого)

Разработана методика расчета полей смещений и напряжений в нанозерне при наличии в нем нанодвойника. Изучено напряженное состояние в нанозерне, имеющем форму правильного многоугольника и содержащем нанодвойник. Определены точки концентрации напряжений в зерне наноматериала. Проанализирована зависимость напряжений от параметров двойника.

**Ключевые слова:** наноматериалы, нанозерно, зернограничные дислокации, двойникующие дислокации, нанодвойникование.

**Введение.** Наноматериалы – ультрамелкозернистые поликристаллические материалы [1]. Широкое использование наноструктурных металлов и сплавов в качестве конструкционных и функциональных материалов в настоящее время сдерживается из-за их особенных свойств. Так, наряду с высокой прочностью и твердостью наноструктурные металлы обладают очень низкой пластичностью, что создает существенные препятствия для их применения в конструкциях деталей машин [2]. Повышение пластичности наноструктурных материалов может быть достигнуто за счет искусственного нанодвойникования. Благодаря чему наноматериалы (металлы) приобретают высокие показатели механических свойств, позволяющие существенно расширить их область применения [1]. При этом проанализировать приобретаемые в результате нанодвойникования структуры и свойства нанометаллов можно путем изучения напряженно-деформированного состояния зерна наноматериала (металла), содержащего нанодвойники.

Цель данной работы – изучение напряженно-деформированного состояния в зерне наноструктурного материала, обусловленного нанодвойникованием.

Рассмотрим представленное на рисунке 1 единичное зерно наноматериала. Данное наноразмерное зерно имеет вид  $n$ -угольника и содержит в своем объеме единичный нанодвойник. В рассматриваемом случае границы зерна смоделированы в виде стенки полных дислокаций, а границы двойника в виде цепочки частичных дислокаций. Зернограничные и двойникующие дислокации в рамках изучаемой задачи в пределах каждой отдельной границы параллельны оси  $OZ$  (рисунок 2).

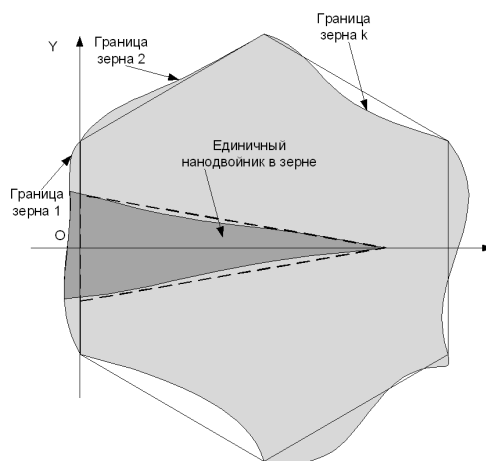


Рисунок 1. – Схематическое изображение единичного зерна наноматериала, содержащего единичный нанодвойник

В рамках проводимого исследования примем, что рассматриваемое нанозерно расположено на некотором расстоянии от поверхности материала. Кроме того, при расчете напряженно-деформированного состояния зерна не будем учитывать никакие напряжения кроме напряжений, обусловленных зернограничными и двойникующими дислокациями [3].

В соответствии с поставленной задачей и принятыми условиями, с учетом методик, описанных в [4, 5], смещения и напряжения, создаваемые двойниковыми и зерновыми границами определяем путем суммирования

смещений и напряжений, создаваемых отдельными дислокациями  $\left(u_i^{(m)}\right)_{tw}$ ,  $\left(\sigma_{ij}^{(m)}\right)_{tw}$ ,  $\left(u_l^{(k)}\right)_b$ ,  $\left(\sigma_{lw}^{(k)}\right)_b$ :

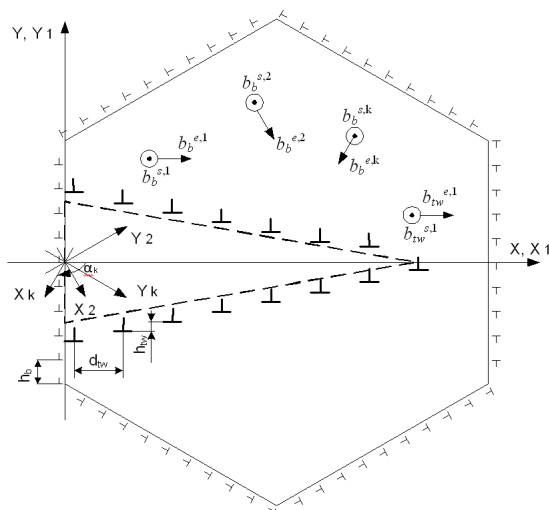


Рисунок 2. – Взаимное расположение зернограницных и двойнивающих дислокаций и их компонент вектора Бюргера

$$u_i = (u_i)_{tw}(x, y) + (u_i)_b(x, y), \quad (1)$$

$$(u_i)_{tw}(x, y) = \sum_{r=0}^{N_{tw}} (u_i^{(1)})_{tw}(x - rd_{tw}, y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}) + \sum_{r=0}^{N_{tw}} (u_i^{(2)})_{tw}(x - rd_{tw}, y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}), \quad (2)$$

$$(u_i)_b(x, y) = \sum_{k=1}^n \sum_l T_{il} \sum_{r=0}^{N_b-1} (u_l^{(k)})_b(x'_k, y'_k - rh_b); \quad (3)$$

$$\sigma_{ij} = (\sigma_{ij})_{tw}(x, y) + (\sigma_{ij})_b(x, y), \quad (4)$$

$$(\sigma_{ij})_{tw}(x, y) = \sum_{r=0}^{N_{tw}} (\sigma_{ij}^{(1)})_{tw}(x - rd_{tw}, y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}) + \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} (\sigma_{ij}^{(2)})_{tw}(x - rd_{tw}, y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}), \quad (5)$$

$$(\sigma_{ij})_b(x, y) = \sum_{k=1}^n \sum_{l,w} T_{il} T_{jw} \sum_{r=0}^{N_b-1} (\sigma_{lw}^{(k)})_b(x'_k, y'_k - rh_b); \quad (6)$$

где  $i$  и  $j$  – индексы, принимающие значения  $x, y$  или  $z$ ;  $l$  и  $w$  – индексы, принимающие значения  $x'_k, y'_k$  или  $z'_k$ ;  $k$  – номер зеренной границы;  $m$  – номер двойниковой границы;  $(u_i)_{tw}(x, y), (\sigma_{ij})_{tw}(x, y)$  – смещения и напряжения, создаваемые двойнивающими дислокациями;  $(u_i)_b(x, y), (\sigma_{ij})_b(x, y)$  – смещения и напряжения, создаваемые зернограницными дислокациями;  $N_{tw}, N_b$  – количество двойнивающих и зернограницных дислокаций, расположенных на отдельной границе (двойника либо зерна);  $d_{tw}, h_{tw}, h_b$  – параметры, характеризующие взаимное расположение дислокаций (см. рисунок 2); системы координат  $XYZ$  и  $X'_k Y'_k Z$  (см. рисунок 2) – системы координат, используемые в расчетах;  $T_{il}, T_{jw}$  – элементы матрицы преобразования [6].

В данном случае рассматриваем поворот правосторонней системы координат  $XYZ$  вокруг оси  $Z$  по часовой стрелке на угол  $\alpha_k$  (см. рисунок 2). При этом матрица преобразования принимает вид [6]

$$T = \begin{pmatrix} \cos(\alpha_k) & \sin(\alpha_k) & 0 \\ -\sin(\alpha_k) & \cos(\alpha_k) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

В соответствии с представленными на рисунке 2 системами координат и ориентировками векторов Бюргерса, а также с [3, 6], дальнейшие расчеты проводим следующим образом:

$$\begin{aligned}
 (u_x)_{tw}(x, y) &= \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{b_{tw}^e}{2\pi} \left[ \operatorname{arctg} \frac{y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}}{x - rd_{tw}} + \frac{(y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})(x - rd_{tw})}{2(1-\nu)((y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2)} \right] + \\
 &+ \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{b_{tw}^e}{2\pi} \left[ \operatorname{arctg} \frac{y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}}{x - rd_{tw}} + \frac{(y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})(x - rd_{tw})}{2(1-\nu)((y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2)} \right]; \\
 (u_y)_{tw}(x, y) &= - \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{b_{tw}^e}{2\pi} \left[ \frac{1-2\nu}{2\pi} \ln((y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(x - rd_{tw})^2 - (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2}{4(1-\nu)((y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2)} \right] - \\
 &- \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{b_{tw}^e}{2\pi} \left[ \frac{1-2\nu}{2\pi} \ln((y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2) + \frac{(x - rd_{tw})^2 - (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2}{4(1-\nu)((y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2)} \right]; \\
 (u_z)_{tw}(x, y) &= \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{b_{tw}^s}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}}{x - rd_{tw}} + \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{b_{tw}^s}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}}{x - rd_{tw}}. \quad (8)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (u_x)_b(x, y) &= \sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{b_b^e}{2\pi} \left[ \operatorname{arctg} \frac{y'_k - rh_b}{x'_k} + \frac{(y'_k - rh_b)x'_k}{2(1-\nu)((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2)} \right] + \\
 &+ \sum_{k=1}^n \sin(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{b_b^e}{2\pi} \left[ \frac{1-2\nu}{2\pi} \ln((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2) + \frac{x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2}{4(1-\nu)((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2)} \right]; \\
 (u_y)_b(x, y) &= \sum_{k=1}^n (-\sin(\alpha_k)) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{b_b^e}{2\pi} \left[ \operatorname{arctg} \frac{y'_k - rh_b}{x'_k} + \frac{(y'_k - rh_b)x'_k}{2(1-\nu)((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2)} \right] + \\
 &+ \sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{b_b^e}{2\pi} \left[ \frac{1-2\nu}{2\pi} \ln((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2) + \frac{x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2}{4(1-\nu)((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2)} \right]; \\
 (u_z)_b(x, y) &= \sum_{k=1}^n \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{b_b^s}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y'_k - rh_b}{x'_k}. \quad (9)
 \end{aligned}$$

$$(\sigma_{xx})_{tw} = - \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})[3(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2]}{[(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2]^2} -$$

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}) \left[ 3(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]}{\left[ (x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]^2}; \\
 (\sigma_{yy})_{tw} &= \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}) \left[ (x - rd_{tw})^2 - (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 \right]}{\left[ (x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 \right]^2} + \\
 & + \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}) \left[ (x - rd_{tw})^2 - (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]}{\left[ (x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]^2}; \\
 (\sigma_{zz})_{tw} &= - \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^e \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2} - \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^e \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2}; \\
 (\sigma_{xy})_{tw} &= \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x - rd_{tw}) \left[ (x - rd_{tw})^2 - (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 \right]}{\left[ (x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 \right]^2} + \\
 & + \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x - rd_{tw}) \left[ (x - rd_{tw})^2 - (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]}{\left[ (x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]^2}; \\
 (\sigma_{zx})_{tw} &= - \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^s}{2\pi} \frac{y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2} - \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^s}{2\pi} \frac{y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2}; \\
 (\sigma_{zy})_{tw} &= \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^s}{2\pi} \frac{x - rd_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2} + \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^s}{2\pi} \frac{x - rd_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2}. \quad (10) \\
 (\sigma_{xx})_b &= - \sum_{k=1}^n \cos^2(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[ 3x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} + \\
 & + \sum_{k=1}^n \sin^2(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[ x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} + \sum_{k=1}^n \sin(2\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{x'_k \left[ x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2}; \\
 (\sigma_{yy})_b &= - \sum_{k=1}^n \sin^2(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[ 3x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} + \\
 & + \sum_{k=1}^n \cos^2(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[ x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} - \sum_{k=1}^n \sin(2\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{x'_k \left[ x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2};
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\sigma_{zz})_b &= -\sum_{k=1}^n \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e v}{\pi(1-v)} \frac{y'_k - rh_b}{x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2}; \\
 (\sigma_{xy})_b &= \sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sin(\alpha_k) \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-v)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[ 3x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} + \\
 &+ \sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sin(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-v)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[ x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} + \sum_{k=1}^n \cos(2\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-v)} \frac{x'_k \left[ x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2}; \\
 (\sigma_{zx})_b &= -\sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi} \frac{(y'_k - rh_b)}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]} + \sum_{k=1}^n \sin(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi} \frac{x'_k}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]}; \\
 (\sigma_{zy})_b &= \sum_{k=1}^n \sin(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi} \frac{(y'_k - rh_b)}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]} + \sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi} \frac{x'_k}{\left[ x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]}. \quad (11)
 \end{aligned}$$

Здесь  $v$  – коэффициент Пуассона;  $\mu$  – модуль сдвига;  $b_{tw}^e$  – модуль краевой составляющей вектора Бюргера двойнивающей дислокации;  $b_{tw}^s$  – модуль винтовой составляющей вектора Бюргера двойнивающей дислокации;  $b_b^e$  – модуль вектора Бюргера полной краевой дислокации;  $b_b^s$  – модуль вектора Бюргера полной винтовой дислокации.

Границы двойника и зерна принимаем прямолинейными, а дислокации на рассматриваемых границах равноудаленными друг от друга. Тогда координаты в системах  $X'_k Y'_k Z$  и координаты границ зерен в данных системах координат определяем в соответствии с выражением (4):

$$x'_k = x \cdot \cos(\alpha_k) - y \cdot \sin(\alpha_k), \quad (12)$$

$$y'_k = x \cdot \sin(\alpha_k) + y \cdot \cos(\alpha_k). \quad (13)$$

**Результаты расчетов и их обсуждение.** В качестве базового варианта для исследования было принято шестиугольное наноразмерное зерно, содержащее в своем теле единичный нанодвойник, материал – железо ( $Fe$ ). Для расчетов принимались следующие параметры:  $b_b^e = b_b^s = 0,248$  нм;  $b_{tw}^e = b_{tw}^s = 0,124$  нм [7];  $\mu = 81$  ГПа [6];  $v = 0,29$  [7]. Базовые параметры зерна и двойника:  $N_{tw} = 35$ ,  $h_{tw} = 2b_{tw}^e = 0,248$  нм;  $d_{tw} = 1,736$  нм;  $N_b = 32$ ,  $h_b = 1,736$  нм.

Анализ напряженного состояния был проведен на базе анализа гидростатических  $\sigma_h$  (рисунок 3, а), нормальных  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$ , комбинированных касательных напряжений  $\tau$  (рисунок 3, б), а также касательных напряжений  $\sigma_{xy}$  (рисунок 3, в),  $\sigma_{xz}$  и  $\sigma_{yz}$ . Дополнительные расчеты проводили в соответствии с [7]:

$$\sigma_h = \sum_i \sigma_{ii} / 3, \quad (14)$$

$$\tau = \sqrt{\sigma_{yz}^2 + \sigma_{xz}^2}. \quad (15)$$

В рассматриваемом случае гидростатические ( $\sigma_h$ ) и сдвиговые ( $\sigma_{xy}, \tau$ ) локализованы на границах элементов системы двойник – зерно. Максимальные гидростатические  $\sigma_h$  и сдвиговые  $\sigma_{xy}$  напряжения наблюдаются у устья двойника, а максимальные комбинированные касательные напряжения  $\tau$  – в вершинах зерна.

Концентрация гидростатических напряжений  $\sigma_h$  внутри зерна несколько выше нежели за его пределами. В анализируемом поле напряжений имеют место как сжимающие, так и растягивающие напряжения. Однако выявить четкую характеристику знакопеременности напряжений не представляется возможным (см. рисунок 3, а).

Локализация нормальных напряжений  $\sigma_{xx}$  внутри зерна значительно выше, нежели за его пределами. При этом выше оси  $OX$  преобладают сжимающие напряжения, а ниже – растягивающие. На участках максимальной концентрации (зеренные и двойниковые границы) напряжения  $\sigma_{xx}$  носят сжимающий характер. При этом максимальные значения  $\sigma_{xx}$  отмечены у устья двойника.

Нормальные напряжения  $\sigma_{yy}$  локализованы на зеренных и двойниковых границах и имеют относительно равномерное распределение внутри зерна и за его пределами. В пределах зерна имеют место как растягивающие (в I и III четвертях относительно осей, проходящих через вершину двойника), так и сжимающие напряжения (соответственно во II и IV четвертях). За пределами зерна преобладают отрицательные значения  $\sigma_{yy}$ . Напряжения на границах двойника и зерна носят сжимающий характер и имеют максимальные значения на границе зерна, к которой прилегает устье двойника.

Концентрация нормальных напряжений  $\sigma_{zz}$  внутри зерна и за его пределами отличается несущественно. При этом выше оси  $OX$  напряжения отрицательны, а ниже данной оси – положительны. На границах же зерна и двойника напряжения  $\sigma_{zz}$ , аналогично напряжениям  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ , являются сжимающими, а максимальные значения  $\sigma_{zz}$  соответствуют устью двойника. При этом максимальные напряжения  $\sigma_{zz}$  на порядок ниже максимальных значений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ .

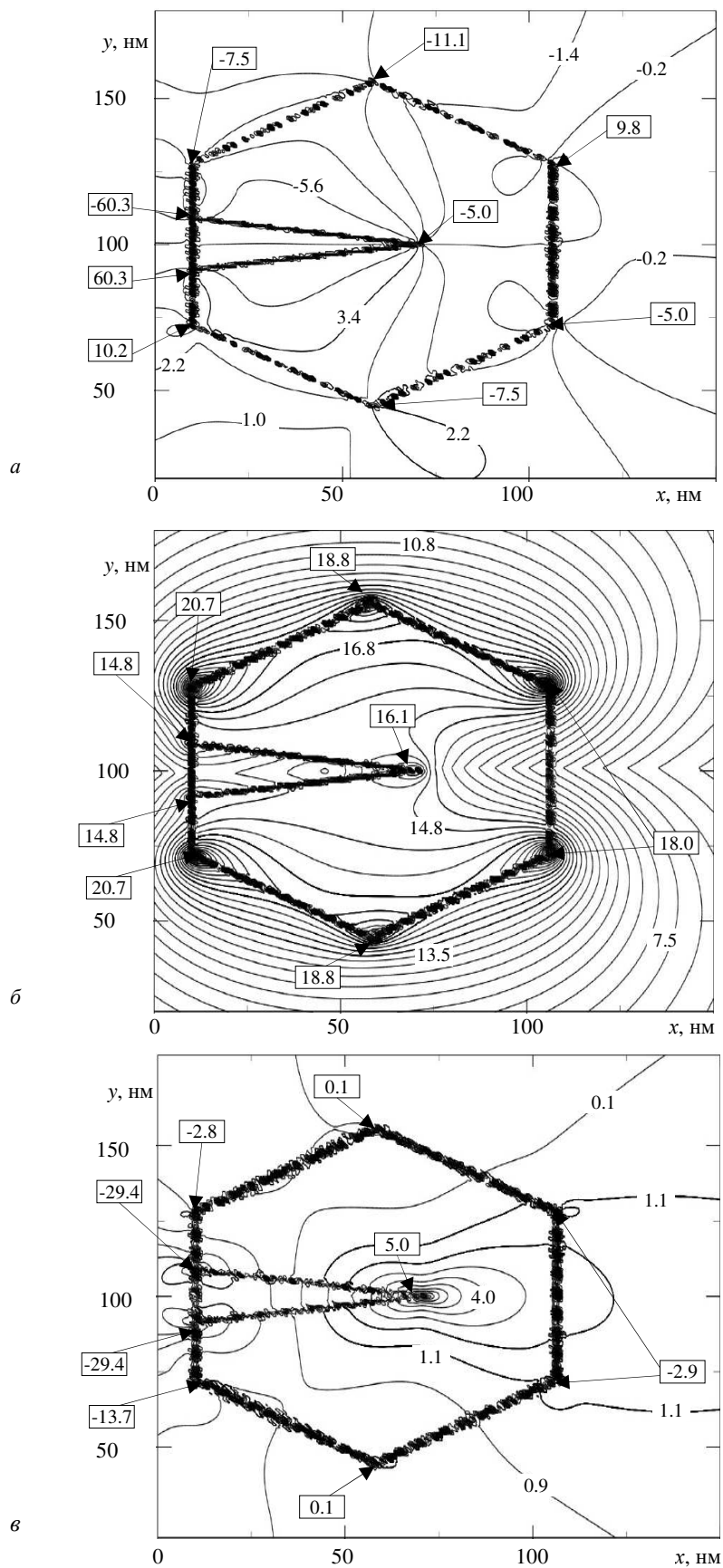
Комбинированные касательные напряжения  $\tau$  можно охарактеризовать высокой концентрацией напряжений на зеренных и двойниковых границах, а также в узловых точках. Концентрация напряжений  $\tau$  за пределами зерна выше концентрации внутри него. При этом максимальные численные значения  $\tau$  имеют место в вершинах зерна (см. рисунок 3, б).

Распределение напряжений  $\sigma_{xz}$  характеризуется максимальными значениями, соответствующими устью двойника. Преобладающими являются сжимающие напряжения  $\sigma_{xz}$ , они расположены на границах двойника и зерна (места наибольшей локализации  $\sigma_{xz}$ ), а также выше оси  $OX$ . Ниже оси  $OX$  имеют место растягивающие напряжения (кроме границ).

Как было отмечено выше сдвиговые напряжения  $\sigma_{yz}$  имеют максимальную концентрацию на границах двойника и зерна, при этом напряжения носят сжимающий характер. Концентрация данной компоненты тензора напряжений внутри зерна превышает концентрацию за его пределами. При удалении от границ зерна концентрация напряжений  $\sigma_{yz}$  существенно снижается, также снижаются и численные значения напряжений. Максимальные значения  $\sigma_{yz}$  отмечены на границе зерна, к которой прилегает устье двойника.

Сдвиговые напряжения  $\sigma_{xy}$  знакопеременны относительно оси, проходящей параллельно оси  $OY$  через середину двойника. Слева от данной оси напряжения  $\sigma_{xy}$  отрицательны, а справа – положительны. В местах локализации  $\sigma_{xy}$  (зеренные и двойниковые границы) преобладают сжимающие напряжения, максимальные их значения можно отметить на границе, к которой прилегает устье двойника (см. рисунок 3, в).

В рамках данного исследования также были проведены расчеты полей напряжений для пятиугольного и семиугольного зерен. Результаты свидетельствуют о том, что форма зерна не существенно влияет на характер распределения полей напряжений. В случае пятиугольного и семиугольного зерна аналогично варианту с шестиугольным зерном основные элементы рассматриваемой системы (зеренные и двойниковые границы), являются не только концентраторами напряжений, но соответственно и местом локализации напряжений.



$a - \sigma_h(x, y); b - \sigma_r(x, y); в - \sigma_{xy}(x, y)$

Рисунок 3. – Распределение напряжений в шестиугольном зерне нанокристалла, обусловленных наличием единичного клиновидного нанодвойника

Кроме того, было рассчитано влияние параметров двойника на напряженное состояние в зерне наноматериала. В качестве варьируемых параметров приняты количество дислокаций на границах двойника ( $N_{tw}$ ) и расстояние между двойнивающими дислокациями, измеренное вдоль оси  $OX$  ( $d_{tw}$ ).

Так, при увеличении количества двойнивающих дислокаций ( $N_{tw} = 2, 7, 15, 25, 35, 45$ ) увеличивается концентрация гидростатических напряжений  $\sigma_h$  в пределах зерна, а за его пределами концентрация не изменяется. В отношении гидростатического напряжения  $\sigma_h$  на основных элементах системы можно отметить, что количество двойнивающих дислокаций  $N_{tw}$  оказывает влияние на  $\sigma_h$  только на границе зерна, к которой прилегает устье двойника. При этом характер распределения напряжений на данной границе не изменяется. Имеет место лишь незначительное изменение численных значений  $\sigma_h$  при изменении  $N_{tw}$ . На остальных границах зерна количество двойнивающих дислокаций  $N_{tw}$  не оказывает влияние на гидростатическое давление. Следует также отметить отсутствие зависимости напряжений  $\sigma_h$  от количества двойнивающих дислокаций  $N_{tw}$ , измеренное вдоль оси  $OX$ .

Анализируя распределение гидростатических напряжений  $\sigma_h$  вдоль границ двойника, можно отметить следующее. Характер распределения анализируемых напряжений не зависит от  $N_{tw}$ , лишь размерные характеристики распределения обусловлены длиной двойника и соответственно  $N_{tw}$ .

В отношении комбинированных касательных напряжений  $\tau$  и сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  можно отметить, что количество двойнивающих дислокаций  $N_{tw}$  не оказывает существенного влияния на характер распределения полей напряжений. При этом численные значения анализируемых компонент тензора напряжений ( $\sigma_{xy}$  и  $\tau$ ) имеют тенденцию к увеличению при увеличении  $N_{tw}$ .

По результатам исследования влияния расстояния между двойнивающими дислокациями, измеренного вдоль оси  $OX$  ( $d_{tw} = 0,248; 0,744; 1,240; 1,736; 1,984; 2,232$  нм), можно отметить, что на анализируемые характеристики напряженного состояния ( $\sigma_h$ ,  $\tau$ ,  $\sigma_{xy}$ ) параметр  $d_{tw}$  не оказывает существенного влияния.

Таким образом, изучено напряженно-деформированное состояние в зерне наноструктурного материала, обусловленного нанодвойникованием. Разработана методика расчета полей смещений и напряжений в нанозерне, имеющем форму многоугольника и содержащем в своем теле единичный нанодвойник. Выявлены места концентрации напряжений в нанозерне. Проведен анализ зависимости распределения полей напряжений от параметров нанодвойника.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Овидько, И.А. Влияние миграции двойниковых границ на трещиностойкость нанодвойникованных металлов / И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман // Materials Physics and Mechanics. – 2014. – № 21. – С. 248–258.
2. Объемные наноструктурные металлы и сплавы с уникальными механическими свойствами для перспективных применений / Р.З. Валиев [и др.] // Вестник УГАТУ. – 2006. – № 3. – С. 23–34.
3. Дробышевская, Т.В. Задача о расчете напряженно-деформированного состояния, обусловленного единичным некогерентным двойником в пяти-, шести- и семигранном зерне поликристалла с гексагональной структурой / Т.В. Дробышевская, О.М. Остриков // Физ. мезомех. – 2015. – Т. 18. – № 2. – С. 79–88.
4. Остриков, О.М. Механика двойникования твердых тел : моногр. / О.М. Остриков. – Гомель : ГГТУ им. П.О. Сухого, 2008. – 301 с.
5. Остриков, О.М. Поле упругих деформаций и смещений в системе «Клиновидный нанодвойник – цепочка полных дислокаций» / О.М. Остриков // Вестник ГГТУ им. П.О. Сухого. – 2011. – №4 (47).
6. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М. : Атомиздат, 1972. – 600 с.
7. Миркин, Л.И. Физические основы прочности и пластичности (Введение в теорию дислокаций) / Л.И. Миркин. – М. : Изд-во МГУ, 1968. – 538 с.

Поступила 13.10.2017

#### THE CALCULATION OF THE STRESS-STRAIN STATE IN NANOZINE DUE TO NEODOLIMAYA

*T. DROBYSHEVSKAYA, O. OSTRIKOV*

*The developed method of calculation of fields of displacements and stresses in nanozine in the presence of nanovoice. The stress state in a nanosecond having the shape of a regular polygon and containing a nanodvoir is studied. The stress concentration points in the grain of nanomaterial are determined. The dependence of stresses on the parameters of the double is analyzed.*

**Keywords:** nanomaterials, nanozero, grain boundary dislocations, double dislocations, nanodvoynikovanie.